

УДК 621.78

**Ю. В. Сарычева^{*}, А. А. Куклина, П. Д. Лебедев, М. В. Майсурадзе,
Ю. В. Юдин**

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург

**yu.sarycheva92@yandex.ru*

Научный руководитель — проф., д-р техн. наук Ю. В. Юдин

ПОИСК МОДЕЛИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЛОГИСТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ КИНЕТИКИ РОСТА НОВОЙ ФАЗЫ

С помощью компьютерной программы моделирования кинетики фазового перехода первого рода собраны статистические данные для анализа уравнения КДМА и логистической функции.

Ключевые слова: уравнение КДМА, логистическая функция

Y. V. Sarycheva, A. A. Kuklina, P. D. Lebedev, M. V. Maisuradze, Yu. V. Yudin

THE SEARCH OF THE MODEL FOR THE DETERMINE THE OPTIMAL PARAMETERS OF THE LOGISTIC FUNCTION OF THE GROWTH KINETICS OF A NEW PHASE

Using the virtual program for calculating the phase transition kinetics, statistical data were collected to analyze the KDMA equation and the logistic function.

Key words: KDMA equation, logistic function

На сегодняшний день для расчета роста новой фазы используется уравнение Колмогорова — Джонсона — Мейла — Аврами (далее уравнение КДМА) (1) [1; 2], однако есть функции с лучшим приближением, описывающие этот процесс, например логистическая функция (2):

$$P_{\text{КДМА}} = 1 - \exp(-k \cdot \tau^n), \quad (1)$$

где $P_{\text{КДМА}}$ — объемная доля образованной фазы; τ — время, с; k, n — температурно-зависимые параметры уравнения.

$$P_{\text{лог}} = 1 - \frac{1}{1 + \tau^a + \exp(b)}, \quad (2)$$

где $P_{\text{лог}}$ — объемная доля образованной фазы; τ — время, с; a, b — температурно-зависимые параметры уравнения.

Для сравнения качества аппроксимации функций (1) и (2) использовалась компьютерная модель расчета кинетики фазового перехода в кристалле [1].

В объеме с числом ячеек $400 \times 400 \times 400$ со случайным распределением зародышей (рис. 1, а) происходит рост новой фазы. Первоначально выбранный режим программы смещал зародыши в сторону одной из граней с заданным коэффициентом сдвига, обеспечивая существенную локальную неоднородность концентрации зародышей.

Регулируемые параметры программы: первоначальное количество зародышей 100...800, среднее расстояние между зародышами 33...74 и среднеквадратичное отклонение расстояния зародышей относительно друг друга 2...22.

На рисунке 1, б показана скорость роста новой фазы, описанная по уравнению КДМА и логистической функции, которая более точно повторяет расчетно-экспериментальные значения. При этом отношение сумм квадратов отклонений функций (1) и (2) от расчетно-экспериментальных значений $f_{\text{КДМА}}/f_{\text{лог}}$ достигает 20.

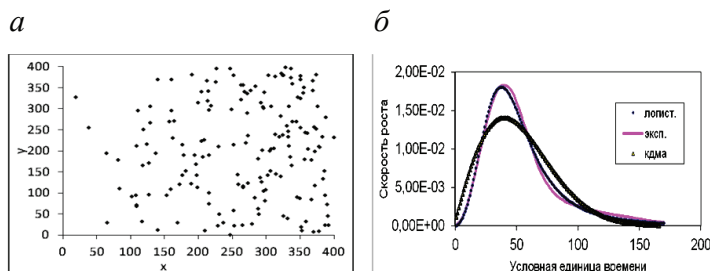


Рис. 1. Проекция сгенерированного объемного распределения зародышей в плоскости $X-Y$:

а — скорость роста новой фазы; б — по уравнению КДМА, логистической функции и расчетно-экспериментальными данными

С помощью регрессионного анализа выбрана модель (3), позволяющая регулированием параметров обеспечить существенно лучшее аналитическое описание процесса имитационного моделирования роста

второй фазы при существенно неравномерном начальном распределении зародышей.

$$\frac{f_{\text{КДМА}}}{f_{\text{лог}}} = -53 + 1,23 \cdot 10^{-1} \cdot N - 4,85 \cdot 10^{-2} \cdot S \cdot l - 8,04 \cdot 10^{-5} \cdot N^2 + 2,41 \cdot 10^{-2} \cdot l^2, \quad (3)$$

где N — первоначальное количество зародышей, l — среднее расстояние между зародышами, S — среднеквадратичное отклонение расстояния между ближайшими зародышами.

Адекватность описания полученной модели (3) приведена на рис. 2, а.

Для выполнения условия $f_{\text{КДМА}}/f_{\text{лог}} > 15$ необходимо обеспечить противоречивые условия: максимальное СКО и минимальное количество зародышей (рис. 2, б). Эти параметры нелинейно обратны друг от друга. Кроме того, отчетливо проявляется дискретный характер работы генератора случайных чисел (координат зародышей) в отдельных объемах факторного пространства, на что указывает сингулярность поверхности (рис. 2, б).

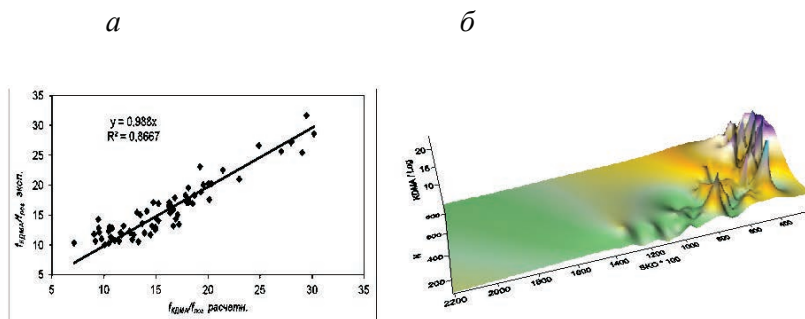


Рис. 2. Графики соотношения:

- а — расчетных и расчетно-экспериментальных данных по модели (3);
- б — логистической функции и КДМА в зависимости от первоначального числа частиц и СКО расстояния

Таким образом, логистическая функция существенно лучше описывает кинетику роста новой фазы по сравнению с уравнением КДМА при исходном неравномерном распределении зародышей, а также условия минимального количества и максимального диапазона изменения расстояния между зародышевыми частицами.

Литература

1. Применение имитационного моделирования для оценки характеристик изотермического превращения аустенита в сталях / Ю. В. Юдин [и др.] // Сталь. 2018. № 10. С. 56–63.
2. Куклина А. А. Исследование параметров уравнения Колмогорова — Джонсона — Мейла — Аврами кинетики бейнитного превращения сталей // XV Международная научно-техническая Уральская школа-семинар металлословедов-молотдых ученых : сборник научных трудов. (Екатеринбург, 12 декабря 2014 г.). Екатеринбург : УрФУ, 2014. С. 45–47.